УДК 531.19

Сёмкин Сергей Викторович, Смагин Виктор Павлович
Владивостокский государственный университет экономики и сервиса
Владивосток, Россия

Одномерная цепочка изинговских спинов

Рассмотрено применение методов среднего поля и усреднения по обменным полям к кластерам из одного и двух атомов в линейной цепочке изинговских спинов. Получены значения намагниченности и корреляционных функций в различных приближениях.

Ключевые слова и словосочетания: фазовые переходы, корреляционные функции, одномерная модель Изинга.

Существует класс приближенных методов нахождения намагниченности и температуры Кюри магнетиков – методов, основанных на использовании самосогласованных уравнений. К ним относятся известные методы среднего поля, приближение Бете, а также метод усреднения по обменным полям, рассмотренный в работах [1-4]. Все самосогласованные методы можно классифицировать следующим образом. Выделяя в решетке кластер из n атомов и рассматривая эти атомы как находящиеся в полях $h + h_i$, где h_i – «обменные» поля, запишем равенство, являющееся обобщением равенства, полученного в [5]:

$$\langle \sigma \rangle = \langle f_n(K, h, h_1, \dots h_n) \rangle. \tag{1}$$

Для $n = 1$ и $n = 2$ «кластерные» функции f_n имеют следующий вид:

$$f_1(K, h, h_1,) = \operatorname{th}(Kh_1 + h), \tag{2}$$

$$f_2(K, h, h_1, h_2) = \frac{\operatorname{sh}(K(h_1 + h_2) + 2h)}{\operatorname{ch}(K(h_1 + h_2) + 2h) + \mathrm{e}^{-2K} \operatorname{ch} K(h_1 - h_2)}. \tag{3}$$

Усреднение в (1) проводится по функции распределения полей h_i, которую можно заменить тем или иным приближением. Суть самосогласованных приближений заключается в следующей процедуре. Приближенное выражение для функции распределения полей h_i строится с помощью параметра μ, через который выражается и намагниченность m. Возможны два способа реализации этой процедуры – «однокластерный» и «ренормгрупповой». В однокластерном способе рассматривается один кластер из n атомов и используются равенства $m = \langle f_n(K, h, h_1, \dots h_n)\rangle_{W(\mu)}$ и $m = \mu$, а в ренормгрупповом рассматриваются два кластера из n и n' атомов соответственно, m и μ находятся из уравнений $m = \langle f_n(K, h, h_1, \dots h_n)\rangle_{W(\mu)}$ и $\langle f_n(K, h, h_1, \dots h_n)\rangle_{W(\mu)} = \langle f_{n'}(K, h, h_1, \dots h_{n'})\rangle_{W'(\mu)}$.

Рассмотрим приближенную плотность вероятности:

$$W_n^f(h_1, \dots h_n, \mu) = \delta(h_1 - q_1\mu) \dots \delta(h_n - q_n\mu), \tag{4}$$

где q_i – число внешних соседей i-го узла кластера.

Однокластерный способ получения самосогласованных уравнений с использованием этой функции приводит к известному методу среднего поля [6], ренормгрупповой (для кластеров с $n = 1$ и $n' = 2$) – к приближению Бете [6].

Построим приближенную плотность вероятности $W_n^s(h_1, \dots h_n, \mu)$ следующим образом. Будем считать спиновые переменные, соответствующие узлам, соседним к узлам кластера, независимыми случайными величинами, принимающими значение +1 с вероятностью $(1 + \mu)/2$ и значение -1 с вероятностью $(1 - \mu)/2$. Тогда каждая из величин h_i будет иметь биноминальное распределение, а совместное распределение $W_n^s(h_1, \dots h_n, \mu)$ зависит от геометрии решетки [2, 3]. Однокластерный способ с использованием такой функции рассмотрен в [1], а ренормгрупповой – в [2, 3]. Описанные выше способы нахождения намагниченности могут быть обобщены на случай магнетиков, разбавленных немагнитными примесями [1]. Однако в упомянутых выше работах не рассматривались корреляционные функции, хотя из общих соображений можно предположить, что существует внутренняя связь между приближениями и корреляционными функциями. В данной работе мы рассмотрим корреляционные функции для максимально простой модели – одномерной цепочки изинговских спинов и проанализируем поведение этих функций в различных самосогласованных приближениях.

Одномерная модель Изинга определяется следующим образом [6]. Рассмотрим цепочку N узлов, пронумерованных индексом i ($i = 1, \dots. N$). Пусть в каждом узле этой цепочки находится изинговский «спин», принимающий значения 1 и -1. Положим, что взаимодействуют только спины, находящиеся в соседних узлах. Тогда энергия системы имеет вид:

$$E = -J\sum_{i=1}^{N}\sigma_i\sigma_{i+1} - H_{ex}\sum\sigma_i \tag{5}$$

Здесь J – константа обменного взаимодействия, H_{ex} пропорциональна внешнему магнитному полю. Кроме того, полагаем, что $\sigma_{N+1} = \sigma_1$, то есть на цепочку наложено периодическое граничное условие. Используя формулу (1), получим выражение для статистической суммы:

$$Z_N = \sum_{\{\sigma\}}\exp(K\sum_{i=1}^{N}\sigma_i\sigma_{i+1} + h\sum\sigma_i), \tag{6}$$

где $K = J/kT$,

$h = H_{ex}/kT$,

k – постоянная Больцмана,

T – температура системы.

Как известно [6], намагниченность M в одномерной модели Изинга (равная среднему значению спина) в термодинамическом пределе ($N \to \infty$) равна:

$$M(K,h) = \frac{\operatorname{sh}h}{\sqrt{\operatorname{sh}^2 h + e^{-4K}}}. \tag{7}$$

Этот результат можно получить, представив статистическую сумму (6) в виде следа N-й степени трансфер-матрицы и выразив сумму через собственные значения этой матрицы [6]. Кроме того, можно найти аналитическое выражение для корреляционной функции i-го и j-го спина:

$$g_{ij} = \langle\sigma_i\sigma_j\rangle - \langle\sigma_i\rangle\langle\sigma_j\rangle = (1 - M^2)\left(\frac{\operatorname{ch}h - \sqrt{\operatorname{sh}^2 h + e^{-4K}}}{\operatorname{ch}h + \sqrt{\operatorname{sh}^2 h + e^{-4K}}}\right)^{|j-i|}. \tag{8}$$

Рассмотрим теперь некоторые самосогласованные приближения для одномерной модели Изинга. Рассматривая кластеры из одного и двух атомов и применяя однокластерный способ с использованием функции распределения (4), получим приближения среднего поля, которые в дальнейшем будем обозначать 1a (для кластера из одного атома) и 1b (для кластера из двух атомов). Уравнения для намагниченности m в этих приближениях таковы

$$m = \operatorname{th}(2Km + h) \text{ и } m = \frac{\operatorname{sh}(2Km + 2h)}{\operatorname{ch}(2Km + 2h) + e^{-2K}}. \tag{9}$$

Поведение намагниченности, получаемой из этих уравнений, сильно отличается от точного решения (7), в частности, из (9) следует наличие ненулевой намагниченности при конечных температурах в отсутствие внешнего поля. И, как будет показано ниже, вычисление корреляционных функций в этих приближениях не приводит ни к каким разумным оценкам.

Применив ренормгрупповой способ к кластерам из одного и двух атомов и использовав функцию распределения (4), получим:

$$m = \operatorname{th}(2K\mu + h) = \frac{\operatorname{sh}(2K\mu+2h)}{\operatorname{ch}(2K\mu+2h)+e^{-2K}}. \tag{10}$$

Этот метод, который мы в дальнейшем будем обозначать 1c, приводит к точному решению (7), что не удивительно, поскольку одномерную цепочку Изинга можно рассматривать как частный случай решетки Бете. Убедиться в этом можно следующим образом. Обозначим $x = \exp(2K\mu)$.

Тогда $\frac{x^2e^h-e^{-h}}{x^2e^h+e^{-h}} = \frac{x^2e^{2h}-e^{-2h}}{x^2e^{2h}+e^{-2h}+2xe^{-2K}}$ или $x^2e^{h-2K} - 2x\operatorname{sh}h - e^{-h-2K} = 0$.

Отсюда $x = (\operatorname{sh}h + \sqrt{D})e^{2K-h}$, $D = \operatorname{sh}^2 h + e^{-4K}$и
$m = \frac{x^2e^h-e^{-h}}{x^2e^h+e^{-h}} = \frac{\operatorname{sh}h}{\sqrt{\operatorname{sh}^2h+e^{-4K}}} = M(K,h)$.

Применение биноминального распределения $W_1^s(h_1,\mu)$ и однокластерного способа для кластера из одного атома (метод 2a) приводит к уравнению:

$$A_1m^2 + B_1m + C_1 = 0 \tag{11}$$

$A_1 = (\operatorname{th}(2K+h) + \operatorname{th}(-2K+h) - 2\operatorname{th}h)/4$,

$B_1 = (\operatorname{th}(2K+h) - \operatorname{th}(-2K+h) - 2)/2$,

$C_1 = (\operatorname{th}(2K+h) + \operatorname{th}(-2K+h) + 2\operatorname{th}h)/4$.

Для кластера из двух атомов (метод 2b) – к уравнению:

$$A_2m^2 + B_2m + C_2 = 0, \tag{12}$$

$A_2 = (\frac{\operatorname{sh}(2K+2h)}{\operatorname{ch}(2K+2h)+e^{-2K}} + \frac{\operatorname{sh}(-2K+2h)}{\operatorname{ch}(-2K+2h)+e^{-2K}} - 2\frac{\operatorname{sh}(2h)}{\operatorname{ch}(2h)+e^{-2K}})/4$,

$B_2 = (\frac{\operatorname{sh}(2K+2h)}{\operatorname{ch}(2K+2h)+e^{-2K}} - \frac{\operatorname{sh}(-2K+2h)}{\operatorname{ch}(-2K+2h)+e^{-2K}} - 2)/2$,

$$C_2 = \left(\frac{\mathrm{sh}(2K+2h)}{\mathrm{ch}(2K+2h)+\mathrm{e}^{-2K}} + \frac{\mathrm{sh}(-2K+2h)}{\mathrm{ch}(-2K+2h)+\mathrm{e}^{-2K}} + 2\frac{\mathrm{sh}(2h)}{\mathrm{ch}(2h)+\mathrm{e}^{-2K}}\right)/4,$$

а согласно ренормгрупповому способу с использованием биноминального распределения (метод 2с) намагниченность находится из уравнений:

$$m = A_1\mu^2 + (B_1 + 1)\mu + C_1, \tag{13}$$

$$(A_1 - A_2)\mu^2 + (B_1 - B_2)\mu + (C_1 - C_2) = 0.$$

Корреляционные функции для всех приближений найдем следующим образом. Используя (7) и (8), можно построить функции распределения по обменным полям для кластеров из одного и двух атомов:

$$W_1(h_1) = P_{1,1}\delta(h_1 - 2) + 2P_{1,-1}\delta(h_1) + P_{-1,-1}\delta(h_1 + 2), \tag{14}$$

где $P_{1,1} = \frac{(1+M)^2}{4} + \frac{g_{13}}{4}$, $P_{1,-1} = \frac{1-M^2}{4} - \frac{g_{13}}{4}$, $P_{-1,-1} = \frac{(1-M)^2}{4} + \frac{g_{13}}{4}$

$$W_2(h_1, h_2) = Q_{1,1}\delta(h_1 - 1)\delta(h_2 - 1) + Q_{1,-1}\delta(h_1 - 1)\delta(h_2 + 1) + \\ + Q_{1,-1}\delta(h_1 + 1)\delta(h_2 - 1) + Q_{-1,-1}\delta(h_1 + 1)\delta(h_2 + 1) \tag{15}$$

Величины Q вычисляются так же, как и P, только вместо g_{13} нужно взять g_{14}. Непосредственной проверкой можно убедиться, что усреднение (2) и (3) по функциям распределения $W_1(h_1)$ и $W_2(h_1, h_2)$ равно точному значению намагниченности (3). Выражая из этих равенств g_{13} и g_{14}, получим:

$$g_{13} = -(A_1M^2 + B_1M + C_1)/A_1 \\ \text{и } g_{14} = -(A_2M^2 + B_2M + C_2)/A_2. \tag{16}$$

Эти же выражения мы будем использовать для нахождения приближенных значений корреляционных функций, подставляя вместо M соответствующее приближенное значение намагниченности m. Несколько сложнее построить выражение для нахождения приближенных значений корреляции между соседними спинами g_{12}. Это выражение можно построить следующим образом. Рассмотрим кластер, состоящий из двух соседних атомов, и вычислим среднее значение произведения их спинов по ансамблю с гамильтонианом (5):

$$w_2(K, h, h_1, h_2) = \frac{\mathrm{ch}(K(h_1+h_2)+2h) - \mathrm{e}^{-2K}\mathrm{ch}K(h_1-h_2)}{\mathrm{ch}(K(h_1+h_2)+2h) + \mathrm{e}^{-2K}\mathrm{ch}K(h_1-h_2)}.$$

Теперь можно найти корреляционную функцию g_{12} по формуле:

$$g_{12} = \langle w_2(K, h, h_1, h_2) \rangle - M^2, \tag{17}$$

где усреднение в первом слагаемом правой части проводится по функции распределения (15).

Непосредственной проверкой можно убедиться, что это выражение совпадает с (8). Это же выражение мы будем использовать для нахождения приближенного значения g_{12}, заменяя M на m и проводя усреднение по соответствующей приближенной функции распределения.

На рисунке 1 показаны зависимости намагниченности от параметра К при фиксированном значении h=0,1. Кривые 1 и 2 построены по методам 1a и 1b соответственно, кривые 3 и 4 – по методам 2a и 2b. Кривая 6 – точное решение, а кривая 5 – ренормгрупповой метод с усреднением по биноминальной функции распределения – 2c. На рисунке 2 приведены графики зависимостей от К при том же h значении корреляционной функции g_12, вычисленной по (17) в различных приближениях. Кривые 1 и 2 – по методам 2a и 2b, кривая 3 – по методу 2c, а кривая 4 – точное решение 8.

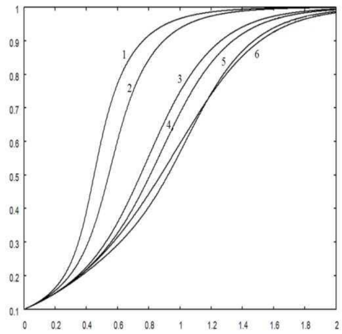

Рис. 1

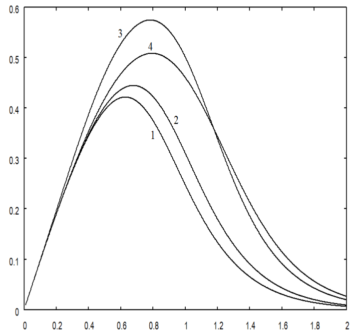

Рис. 2

На рисунке 3 представлены корреляционные функции g_13 найденные по методу 2b (кривая 2), 2c (кривая 3) и точное решение – кривая 4. Кривая 1 показывает корреляционную функцию g_13, вычисленную по методу 2a. Эта функция, как и следовало ожидать из характера этого приближения, равна нулю. Наконец, рис. 4 иллюстрирует зависимости от К функций g_14, вычисленных по второй из формул (16). Кривая 3 на этом рисунке построена по методу 2c, нулевая зависимость 2 – по методу 2b, а кривая 4 – точное решение.

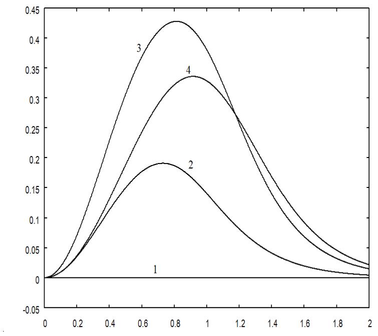

Рис. 3

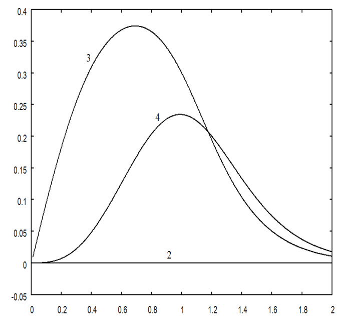

Рис. 4

В целом, анализ поведения корреляционных функций, вычисленных в различных приближениях, позволяет сделать следующие выводы:

1. Метод среднего поля, понимаемый как усреднение выражений типа (2) или (3) по δ – образному распределению (4), не дает никаких разумных оценок для корреляционных функций спинов, находящихся друг от друга дальше, чем размер рассматриваемого кластера.

2. Однокластерные методы, основанные на усреднении по биномиальной функции распределения (2a и 2b), дают более точное значение намагниченности, чем методы среднего поля, основанные на кластерах тех же размеров (1a и 1b). Кроме того, эти методы позволяют получить разумную оценку для корреляционной функции спинов, находящихся на расстоянии, на единицу большем, чем размер кластера (кривая 1 на рис. 1б и кривая 2 на рис. 2).

3. Наиболее точное приближение, как для намагниченности, так и для соответствующих корреляционных функций, дает ренормгрупповой метод 2c. И хотя метод 1c является в данном случае (для линейной цепочки спинов) точным решением, проведенные нами исследования показывают, что метод 2c дает более точные результаты для решеток с более сложной геометрией.

1. Белоконь, В.И. Метод случайного поля в модели Изинга разбавленного ферромагнетика / В.И. Белоконь, С.В. Семкин // ЖЭТФ. – 1992. – Т. 102. – Вып. 4(10). – С. 1254 – 1258.
2. Сёмкин, С.В. Использование метода усреднения по полям взаимодействия для построения ренормгруппового преобразования фиксированного масштаба / С.В. Сёмкин, В.П. Смагин // Физика твердого тела. – 2013. – Т. 55. – Вып. 5. – С. 892 – 895.

3. Сёмкин, С.В. Методы получения самосогласованных уравнений для изинговского магнетика / С.В. Сёмкин, В.П. Смагин // Изв. вузов. Физика. – 2013. – Т. 56. – Вып. 2. – С. 9 – 14.
4. Семкин, С.В. Метод среднего поля и метод усреднения по обменным полям для кластеров магнитных атомов / С.В. Сёмкин, В.П. Смагин // Вестн. Владивостокского государственного университета экономики и сервиса. – Владивосток. – 2012. – №3(16). – С. 266-270.
5. Callen, H.B. Phys. Lett. – 1963. – V. 4. – P. 161 – 175.
6. Бэкстер, Р. Точно решаемые модели в статистической механике / Р. Бэкстер. – М.: Мир, 1985. – 486 с.